

01;02;05;10;11

Новый модельный потенциал взаимодействия для описания движения заряженных частиц в веществе

© Е.Г. Шейкин

Научно-исследовательское предприятие гиперзвуковых систем,
196066 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 25 декабря 1997 г.)

Предложен новый модельный потенциал взаимодействия в форме экранированного кулоновского потенциала. Получены аналитические выражения для тормозной способности ионов в упругих столкновениях. Разработана программа расчета пробегов ионов в аморфном веществе методом Монте-Карло, учитывающая неупругие потери в приближении непрерывного замедления, а упругие в приближении нового модельного потенциала взаимодействия. Проведены расчеты пробегов ионов Cu и Rb в мишенях из C и В. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментом.

Введение

При описании движения быстрых заряженных частиц в веществе используются различные модельные потенциалы межатомного взаимодействия. Широкое распространение получили экранированные кулоновские потенциалы [1], записывающиеся в следующем виде:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right), \quad (1)$$

где Z_1 и Z_2 — заряды ядер сталкивающихся атомных частиц, e — заряд электрона, r — расстояние между сталкивающимися атомами, a — длина экранирования, $\Phi(r/a)$ — функция экранирования.

Обычно $\Phi(r/a)$ аппроксимируется разложением в виде суммы экспонент [1]

$$\Phi(r/a) = \sum_{i=1}^n c_i \exp(-d_i r/a). \quad (1a)$$

Значения коэффициентов разложения c_i и d_i для различных потенциалов представлены в [1,2]. Самым простым потенциалом типа (1) является потенциал Бора, для которого в (1a) $n = 1$, $c_1 = 1$, $d_1 = 1$. Потенциалы взаимодействия типа (1) активно используются при компьютерном моделировании процессов распыления материалов, отражения ионов от поверхности твердого тела, имплантации ионов и т.д. использованием метода Монте-Карло. Несмотря на относительно простой вид потенциала взаимодействия (1), (1a), вычисление параметров быстрой частицы после упругого рассеяния на атомах мишени требует численного интегрирования [1], что резко увеличивает временные затраты при проведении расчетов с большим числом испытаний. Поэтому представляется целесообразным построение нового модельного потенциала, который, правильно отражая основные закономерности рассеяния, позволил бы получить аналитические выражения для расчета параметров быстрой частицы после упругого рассеяния.

Построение нового модельного потенциала взаимодействия

В работе [3] представлены результаты сравнения экспериментальных значений пробегов тяжелых ионов низких и средних энергий в В и С с результатами расчетов методом Монте-Карло по программе TRIM. Результаты расчета по программе TRIM, использующей для описания упругого рассеяния ионов так называемый универсальный потенциал взаимодействия, сильно расходятся с экспериментальными. В то же время в цикле работ [4–7] прохождение тяжелых ионов низких и средних энергий в веществе исследовалось в приближении более простого потенциала взаимодействия. Использовалась модифицированная модель твердых шаров, в которой рассеяние ионов рассматривалось в модели твердых шаров, а полное сечение упругого рассеяния предполагалось зависящим от энергии иона и определялось через известные зависимости тормозной способности ионов от энергии. Полученные в [5,6] аналитические выражения хорошо согласуются с экспериментальными результатами работы [3] при низких энергиях ионов, соответствующих значениям приведенной энергии $\varepsilon < 0.1$ (используются традиционные обозначения). При увеличении энергии в теории наблюдается завышение значений среднеквадратичных отклонений проективных пробегов ионов, что обусловлено применением слишком жесткого потенциала взаимодействия.

Учитывая несомненный успех модифицированной модели твердых шаров при описании прохождения тяжелых ионов низких энергий в веществе, предлагается ввести функцию экранирования в наиболее простой форме, которая аналогично модели твердых шаров обеспечивает конечный радиус взаимодействия сталкивающихся частиц, но при более мягком, чем у твердых шаров, потенциале взаимодействия, переходящим при высоких энергиях ионов к кулоновскому потенциалу. Предлагается следующая функция экранирования:

$$\Phi(r) = \begin{cases} 1 - r/a, & \text{при } r \leq a, \\ 0, & \text{при } r > a, \end{cases} \quad (2)$$

где a — радиус экранирования.

Угол рассеяния налетающего иона при упругом столкновении с атомом мишени в системе центра масс определяется, согласно [1], соотношением

$$\chi = \pi - 2\varphi_0, \quad (3)$$

где

$$\varphi_0 = \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{\rho dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{\rho^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E_r}}},$$

где ρ — прицельный параметр; r_{\min} — расстояние максимального сближения сталкивающихся частиц; E_r — кинетическая энергия в системе центра масс, связанная с энергией иона в лабораторной системе E (при неподвижных атомах мишени) соотношением $E_r = m_2 E / (m_1 + m_2)$, m_1 — масса иона, m_2 — масса атома мишени.

Подставив в (3) потенциал (1) с функцией экранирования в форме (2), после несложных математических преобразований получим следующее выражение для косинуса угла рассеяния в системе центра масс:

$$\cos \chi = 1 - \frac{2(1-t)(\tilde{\rho}/a)^2}{4t + 4t(\tilde{\rho}/a) + (\tilde{\rho}/a)^2}, \quad (4)$$

где $t = (\rho/a)^2$, $\tilde{\rho} = Z_1 Z_2 e^2 / E_r$.

Полученное выражение (4) позволяет определить в явном виде тормозную способность ионов при упругом торможении S_n и страгглинг энергетических потерь в упругих столкновениях Ω^2 . Согласно [8], эти функции определяются следующими соотношениями:

$$S_n = \int_0^{T_{\max}} T d\sigma, \quad \Omega^2 = \int_0^{T_{\max}} T^2 d\sigma,$$

где T — энергия, передаваемая атому мишени при столкновении с ионом; $T_{\max} = 4m_1 m_2 E / (m_1 + m_2)^2$ — максимальная передаваемая энергия; $d\sigma$ — дифференциальное сечение рассеяния.

Учитывая, что $T = T_{\max} \sin^2(\chi/2)$, а $d\sigma = 2\pi\rho d\rho$, получаем

$$S_n = T_{\max} \pi a^2 f(X), \quad \Omega^2 = T_{\max}^2 \pi a^2 F(X),$$

где $f(X) = X[(1+X) \ln(1+1/X) - 1]$,

$$F(X) = X^2 \left[1 + (1+X)(1/X - 2 \ln(1+1/X)) \right],$$

$$X = \frac{(\tilde{\rho}/a)^2}{4(1 + \tilde{\rho}/a)}. \quad (5)$$

Перейдем к безразмерным переменным, традиционно используемым при исследовании движения быстрых частиц в веществе, согласно [8]

$$\varepsilon = E \frac{m_2 a_{TF}}{Z_1 Z_2 e^2 (m_1 + m_2)},$$

$$s_n(\varepsilon) = \frac{m_1 + m_2}{m_1} \frac{1}{4\pi a_{TF} Z_1 Z_2 e^2} S_n(E),$$

$$\omega(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{m_1 + m_2}{4Z_1 Z_2 e^2 m_1} \right)^2 \Omega^2(E),$$

$a_{TF} = 0.8853 a_0 / (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}$ — длина экранирования в приближении Томаса–Ферми, a_0 — борковский радиус.

Из (5) получаем выражения для тормозной способности ионов $s_n(\varepsilon)$ и страгглинга энергетических потерь $\omega(\varepsilon)$ в следующем виде:

$$s_n(\varepsilon) = \left(\frac{a}{a_{TF}} \right)^2 \varepsilon f(\tilde{X}(\varepsilon)),$$

$$\omega(\varepsilon) = \left(\frac{a}{a_{TF}} \right)^2 \varepsilon^2 F(\tilde{X}(\varepsilon)),$$

$$\tilde{X}(\varepsilon) = \frac{1}{4} \frac{(a_{TF}/a)^2}{\varepsilon^2 + (a_{TF}/a)\varepsilon}. \quad (6)$$

При $\varepsilon \rightarrow \infty$ из (6) следует $s_n \rightarrow \ln \varepsilon / 2\varepsilon$, $\omega \rightarrow 1/4$, что совпадает с асимптотическим поведением функций s_n и ω для кулоновского потенциала межатомного взаимодействия. При $\varepsilon \rightarrow 0$ $s_n \rightarrow (a/a_{TF})^2 \varepsilon / 2$, $\omega \rightarrow (a/a_{TF})^2 \varepsilon^2 / 3$, что соответствует модели твердых шаров [4].

В экспериментах при низких энергиях наблюдается примерно корневая зависимость тормозной способности ионов от энергии [8], что отличается от зависимости $s_n(\varepsilon)$ из (6). Для того чтобы приблизить формулы (6) к реальности, предлагается считать длину экранирования a зависящей от энергии иона. Тем самым функция экранирования в потенциале взаимодействия (1) предполагается зависящей не только от расстояния между сталкивающимися частицами, но и от энергии иона. Если учесть, что при движении иона в веществе его зарядовое состояние (которое во многом и определяет функцию экранирования) зависит от энергии иона [8,9], то такое предположение выглядит вполне разумным. Для того чтобы обеспечить $s_n \rightarrow \sqrt{\varepsilon}$ при $\varepsilon \rightarrow 0$, введем в формулы (6) зависимость длины экранирования от энергии в виде

$$a = a_{TF} \varepsilon^{-1/4} / \beta, \quad (7)$$

где параметр β можно рассматривать как подгоночный параметр.

При такой зависимости длины экранирования от энергии тормозная способность и страгглинг принимают следующий вид:

$$s_n(\varepsilon) = \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\beta^2} f(\tilde{X}(\varepsilon)),$$

$$\omega(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^{3/2}}{\beta^2} F(\tilde{X}(\varepsilon)),$$

$$\tilde{X}(\varepsilon) = \frac{\beta^2}{4(\varepsilon^{3/2} + \beta \varepsilon^{3/4})}. \quad (8)$$

На рис. 1 и 2 приводится сравнение тормозных способностей ионов и страгглинга энергетических потерь, рассчитанных по формулам (8), с соответствующими функциями для потенциалов Мольера и Кг–С, приведенными в работе [8]. При значениях $\beta = 0.54$ тормозная способность ионов, полученная в данной работе, практически

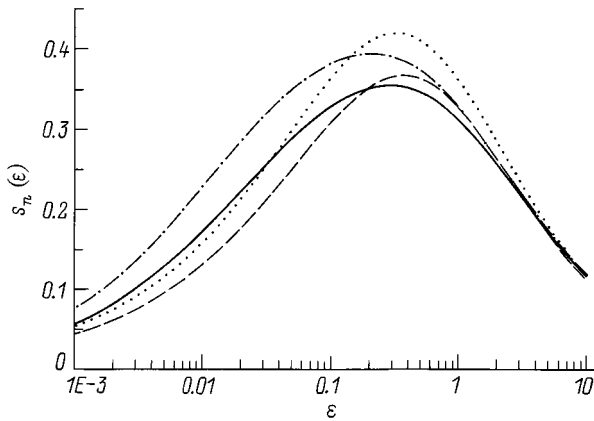


Рис. 1. Тормозные способности ионов для различных потенциалов взаимодействия: сплошная кривая — потенциал Кг–С, штрихпунктир — потенциал Мольера, пунктир — расчет по формуле (8) при $\beta = 0.54$, штриховая — при $\beta = 0.6$.

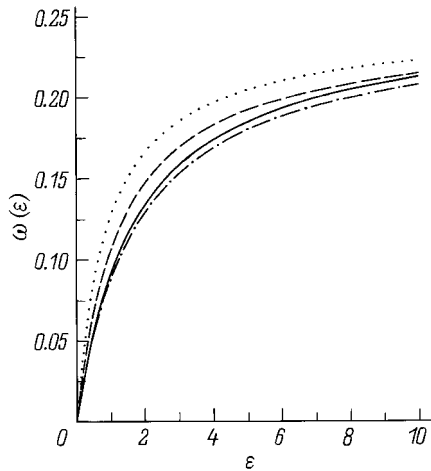


Рис. 2. Страгглинг энергетических потерь для различных потенциалов взаимодействия: сплошная кривая — потенциал Кг–С, штрихпунктир — потенциал Мольера, пунктир — расчет по формуле (8) при $\beta = 0.54$, штриховая — при $\beta = 0.7$.

совпадает с тормозной способностью для потенциала Кг–С при энергиях иона в диапазоне $10^{-3} \leq \epsilon \leq 0.1$. При $\beta = 0.6$ эти тормозные способности практически совпадают в диапазоне энергий $\epsilon > 0.1$. Страгглинг энергетических потерь, полученный в данной работе, при $\beta = 0.54$ превышает страгглинг для потенциалов Мольера и Кг–С. При $\beta = 0.7$ рассчитанный по (8) страгглинг близок к страгглингу для потенциала Кг–С.

Численное моделирование пробегов ионов в веществе с использованием нового модельного потенциала

Нами разработана программа моделирования пробегов ионов в веществе методом Монте-Карло, использующая описанный выше модельный потенциал взаимодей-

ствия. Перечислим приближения, использованные в этой программе. Рассматривается поток ионов с начальной энергией E_0 , падающий ортогонально на поверхность твердого тела, расположенную при значении пространственной координаты $x = 0$. Тело занимает бесконечное полупространство $x > 0$. Ионы, двигаясь в веществе, испытывают упругие столкновения с атомами мишени, в процессе которых случайным образом изменяются энергия ионов и направление их движения. Предполагается, что при движении между последовательными актами упругих столкновений ион теряет энергию в неупругих столкновениях, которые рассматриваются в приближении непрерывного замедления. Движение иона прослеживается до тех пор, пока его энергия не станет меньше некоторой пороговой величины E_{th} . Аналогично [5] пороговая энергия определяется через энергию смещения атома мишени E_d . Расчет прекращается также и в случае выхода иона за границу тела ($x < 0$). При остановке иона в веществе определяется координата, при которой произошла остановка и формируется массив пространственного распределения имплантированных в вещество ионов. Число испытаний (число прослеженных траекторий ионов) выбирается достаточно большим, чтобы обеспечить статистическую достоверность полученных результатов.

При моделировании различных процессов методом Монте-Карло случайные величины обычно выражают через случайную, равномерно распределенную на промежутке от 0 до 1 величину ξ . При моделировании пробегов ионов в веществе в качестве случайных величин рассматриваем длину пробега иона между последовательными упругими столкновениями, прицельный параметр и азимутальный угол рассеяния. Плотность вероятности того, что энергия иона изменится от энергии ϵ до энергии ϵ' за счет процессов неупругого торможения при его движении между двумя последовательными актами упругих столкновений, определяется, согласно [7], следующим соотношением:

$$p(\epsilon, \epsilon') = \frac{1}{Q} \frac{\sigma(\epsilon)}{\pi a_{TF}^2 s_e(\epsilon)} \times \exp \left[- \int_{\epsilon'}^{\epsilon} \frac{1}{Q} \frac{\sigma(\epsilon')}{\pi a_{TF}^2 s_e(\epsilon')} d\epsilon' \right], \quad (9)$$

где $Q = 4m_1m_2/(m_1 + m_2)^2$; $s_e(\epsilon)$ — тормозная способность ионов при неупругом торможении; $\sigma(\epsilon)$ — полное сечение упругого рассеяния, которое определяется через длину экранирования $\sigma(\epsilon) = \pi a^2(\epsilon)$.

С учетом (7) $\sigma(\epsilon) = \pi a_{TF}^2 / (\beta^2 \sqrt{\epsilon})$. Соотношение (9) позволяет выразить энергию ϵ' через случайную величину ξ , используя закон преобразования случайных величин [10]. Предполагая что $s_e(\epsilon) = k\sqrt{\epsilon}$, нетрудно получить

$$\epsilon' = \epsilon^{kQ\beta^2}. \quad (10)$$

Неупругие потери энергии иона в приближении непрерывного замедления описывается следующим уравнени-

ем [7]:

$$\frac{d\varepsilon}{dl} = -As_\varepsilon(\varepsilon),$$

где $A = Qn\pi a_{TF}^2$, n — концентрация атомов мишени.

Из этого уравнения очевидным образом определяется длина пробега иона между упругими столкновениями

$$l = \frac{2}{Ak} (\sqrt{\varepsilon} - \sqrt{\varepsilon'}). \quad (11)$$

Подставив (10) в (11), выразим длину пробега l через случайную величину ξ

$$l = \frac{2\sqrt{\varepsilon}}{Ak} (1 - \xi^{kQ\beta^2/2}). \quad (11a)$$

Значению $\xi = 0$ отвечает максимальная длина пробега $l = 2\sqrt{\varepsilon}/(Ak)$. При $\xi = 1$ $l = 0$. Если неупругими процессами можно пренебречь, $k \rightarrow 0$, из (11a) следует $l \rightarrow \ln(1/\xi)/n\sigma(\varepsilon)$. Это соответствует предельному случаю свободного движения иона между упругими столкновениями [1].

Изменение параметров иона в результате упругого рассеяния на атоме мишени описываются соотношениями из [1]

$$\cos \Theta = \left(1 + \frac{m_2}{m_1} \cos \chi\right) / \sqrt{1 + 2\frac{m_2}{m_1} \cos \chi + \left(\frac{m_2}{m_1}\right)^2},$$

$$\frac{\varepsilon''}{\varepsilon'} = \left(1 + 2\frac{m_2}{m_1} \cos \chi + \left(\frac{m_2}{m_1}\right)^2\right) / \left(1 + \frac{m_2}{m_1}\right)^2,$$

где Θ — угол рассеяния иона в лабораторной системе координат; ε' — энергия иона до столкновения; ε'' — энергия иона после столкновения, $\cos \chi$ определяется формулой (4), в которой величина t пропорциональна квадрату прицельного параметра и моделируется с помощью случайной величины соотношением $t = \xi$.

Координата k -го столкновения иона в веществе x_k определяется суммированием соответствующих смещений иона вдоль оси x при его движении между последовательными упругими столкновениями

$$x_k = \sum_{j=0}^{k-1} l_j \mu_j,$$

где l_j — длина пробега иона между j -м и $(j+1)$ -м упругими столкновениями, μ_j — косинус угла между траекторией иона после j -го столкновения и осью x .

Для μ_j , согласно [5], справедливо следующее рекуррентное соотношение:

$$\mu_j = \mu_{j-1} \cos \Theta + \sqrt{1 - \mu_{j-1}^2} \sin \Theta \cos \psi.$$

Азимутальный угол рассеяния ψ определяется через случайную величину ξ соотношением $\psi = 2\pi\xi$.

В результате прослеживания траекторий N ионов от момента их попадания в вещество и до момента остановки получаем набор значений координат, при которых

произошла остановка ионов в веществе \hat{x}_i , $i = 1, \dots, N$. На основе этих расчетов строятся гистограммы пространственного распределения имплантированных ионов и определяются средние значения: R_p — средний проективный пробег и ΔR_p — среднее квадратичное отклонение проективных пробегов

$$R_p = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \hat{x}_i, \quad \Delta R_p = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \hat{x}_i^2 - R_p^2}. \quad (12)$$

Результаты расчетов методом Монте-Карло

Для описания пробегов ионов в веществе в рамках рассматриваемой модели необходимо задать величину k , определяющую неупругие потери энергии, и величину β , определяющую длину экранирования. Параметры β и k будем рассматривать как подгоночные и определим путем подбора при сопоставлении результатов численных расчетов с экспериментом. В таблице приводятся сравнение экспериментальных значений R_p и ΔR_p из работы [3] с результатами расчетов методом Монте-Карло. Для каждой энергии расчет проводился с прослеживанием 10^5 числа историй. Относительная погрешность расчета средней величины R_p , оцененная в соответствии с [10], в этом случае не превышает 0.3%. Значения β и k для приведенных пар ион-мишень были определены на этапе предварительных расчетов. Для пары Cu-C $\beta = 0.67$, $k = 0.04$, для Rb-C $\beta = 0.6$, $k = 0.04$, для Rb-B $\beta = 0.57$, $k = 0.05$. Из таблицы видно, что результаты численных расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными. Максимальное относительное отклонение теоретических значений R_p и ΔR_p от экспериментальных не превышает 17%. Абсолютное отклонение

Параметры экспериментальных и теоретических пробегов ионов

Ион	Мишень	E , keV	ε	Эксперимент		Теория	
				R_p , Å	ΔR_p , Å	R_p , Å	ΔR_p , Å
Cu	C	30	0.250	280	90	300	88
		50	0.416	430	130	441	124
		79	0.582	570	160	579	157
		100	0.832	785	215	791	205
		150	1.248	1180	320	1162	283
		200	1.664	1547	400	1555	362
Rb	C	10	0.047	104	40	121	34
		30	0.143	210	70	242	65
		50	0.238	330	90	347	90
		80	0.380	500	145	496	123
		100	0.475	590	160	593	144
		150	0.713	850	215	846	195
Rb	B	200	0.951	1077	270	1106	245
		20	0.105	170	45	167	43
		50	0.264	325	80	317	78
		100	0.527	565	150	552	125
		300	1.581	1550	320	1592	310

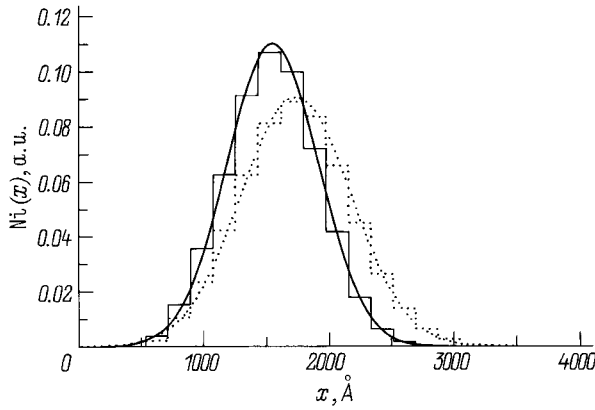


Рис. 3. Пространственное распределение имплантированных ионов Cu с энергией $E = 200$ keV в мишень из углерода: гистограмма — расчет методом Монте-Карло при $\beta = 0.67$ и $k = 0.04$ (сплошная кривая), 0 (пунктир); кривые — функции Гаусса при $R_p = 1555$ Å, $\Delta R_p = 362$ Å (сплошная кривая); при $R_p = 1742$ Å, $\Delta R_p = 440$ Å (пунктир).

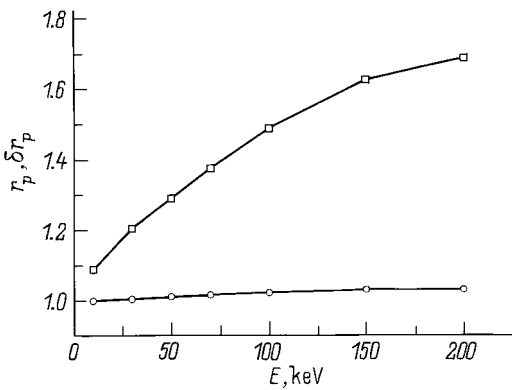


Рис. 4. Сравнение пробегов ионов Cu в мишени из углерода, рассчитанных методом Монте-Карло в приближении модифицированной модели твердых шаров и нового модельного потенциала $\beta = 0.67$, $k = 0.04$: кружки — r_p , квадраты — δr_p .

не превышает 42 Å. На рис. 3 приводятся гистограммы пространственного распределения ионов Cu в мишени из углерода, рассчитанные методом Монте-Карло, для двух приближений: с учетом неупругих потерь ($k = 0.04$) и без учета неупругих потерь ($k = 0$). В том случае, когда неупругие потери не учитываются, максимум пространственного распределения смещается в сторону больших значений x , распределение становится более широким. Так, при изменении k от 0.04 до 0 значение R_p увеличивается от 1555 до 1742 Å, а ΔR_p — от 362 до 440 Å. Как следует из рис. 3, пространственное распределение имплантированных ионов Cu с энергией 200 keV в мишени из углерода с высокой точностью описывается распределением Гаусса

$$Ni(x) = \frac{1}{\Delta R_p \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x - R_p}{\Delta R_p}\right)^2\right).$$

Полученные результаты показывают, что предложенный потенциал взаимодействия позволяет с высокой точностью описывать пробеги ионов в веществе, когда торможение ионов определяется как упругими, так и неупругими потерями энергии. Используем разработанную программу для определения области применимости модифицированной модели твердых шаров, предложенной в [4,5] для расчета пробегов ионов низкой энергии ($\epsilon < 0.1$) в аморфном веществе. В модифицированной модели твердых шаров рассеяние изотропно в системе центра масс, полное сечение упругого рассеяния ионов описывается, согласно [4], соотношением $\sigma(\epsilon) = 2\pi a_{TF}^2 s_n(\epsilon)/\epsilon$. При расчетах методом Монте-Карло $s_n(\epsilon)$ для модифицированной модели твердых шаров определяем из формулы (8).

В программу для расчета пробегов ионов методом Монте-Карло были внесены соответствующие этой модели кооррективы. Результаты расчетов для пары Cu-C в приближении модифицированной модели твердых шаров представлены на рис. 4 в относительной форме. Приведенные на рисунке величины r_p и δr_p являются отношением соответственно величин R_p и ΔR_p , рассчитанных в приближении модифицированной модели твердых шаров к пробегам, рассчитанным в приближении нового (реального) потенциала взаимодействия. Из рис. 4 следует, что проективный пробег ионов R_p , рассчитанный в приближении модифицированной модели твердых шаров, практически совпадает с пробегом, рассчитанным для реального потенциала взаимодействия во всем диапазоне энергий. Среднеквадратичное отклонение ΔR_p в приближении модифицированной модели твердых шаров завышено. Относительная функция δr_p возрастает с увеличением энергии. При энергиях иона $E \leq 10$ keV ($\epsilon \leq 0.083$) величина $\delta r_p < 1.1$, при $E = 30$ keV ($\epsilon = 0.25$) величина $\delta r_p \approx 1.2$. Таким образом, проведенное сравнение показывает, что модифицированная модель твердых шаров в диапазоне энергий $\epsilon < 0.2$ может быть использована для расчета R_p и ΔR_p . В диапазоне больших энергий модифицированная модель твердых шаров может быть использована для расчета проективного пробега R_p , величина ΔR_p в этом случае значительно завышена.

Выводы

В работе предложен новый модельный потенциал взаимодействия в форме экранированного кулоновского потенциала. Получены аналитические выражения для зависимости угла рассеяния в системе центра масс от прицельного параметра и энергии иона. Получены аналитические выражения для тормозной способности ионов в упругих столкновениях и страгглинга их энергетических потерь. Разработана программа моделирования пробегов ионов в веществе методом Монте-Карло, учитывающая упругие потери энергии в приближении нового модельного потенциала взаимодействия, а неупругие потери в приближении непрерывного замедления. Проведены

расчеты пробегов R_p и ΔR_p для ионов Cu и Rb в мишенях из углерода и бора. Результаты расчетов с высокой точностью согласуются с экспериментальными результатами, что свидетельствует об удачном выборе потенциала взаимодействия. Проведенные сравнительные расчеты пробегов ионов в веществе в приближении нового модельного потенциала взаимодействия и в приближении разработанной ранее модифицированной модели твердых шаров показали, что модифицированная модель твердых шаров может быть использована для расчета R_p и ΔR_p при низких энергиях $\varepsilon < 0.2$. Проективный пробег ионов R_p в приближении модифицированной модели твердых шаров практически совпадает во всем диапазоне энергий с проективным пробегом, рассчитываемым в приближении нового, более реалистичного потенциала взаимодействия. Это позволяет в будущем определять подгоночный параметр β , входящий в выражение для длины экранирования нового модельного потенциала, не трудоемким путем, использующим численные расчеты методом Монте-Карло, а более простым способом — из сравнения экспериментальных значений R_p с аналитическими результатами [7], полученными в приближении модифицированной модели твердых шаров.

Список литературы

- [1] Эжитайн В. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. М.: Мир, 1995. 320 с.
- [2] Аккерман А.Ф. Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе. М.: Энергоатомиздат, 1991. 200 с.
- [3] Grande M., Zawislak F.C., Fink D., Behar M. // Nucl. Instr. and Meth. 1991. Vol. B61. N 3. P. 282–290.
- [4] Шейкин Е.Г. // ЖТФ. 1996. Т. 66. Вып. 10. С. 63–75.
- [5] Шейкин Е.Г. // ЖТФ. 1997. Т. 67. Вып. 10. С. 16–20.
- [6] Шейкин Е.Г. // ЖТФ. 1998. Т. 68. Вып. 9. С. 33–36.
- [7] Шейкин Е.Г. // ЖТФ. 1999. Т. 69. Вып. 2. С. 93–97.
- [8] Кумахов М.А., Комаров Ф.Ф. Энергетические потери и пробеги ионов в твердых телах. Минск, 1979. 320 с.
- [9] Оцуки Ё.-Х. Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами. М.: Мир, 1985. 280 с.
- [10] Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973. 312 с.